



TITLE:

Spin Density Waveに対する磁場効果

AUTHOR(S):

山崎, 京子

CITATION:

山崎, 京子. Spin Density Waveに対する磁場効果. 物性研究 1967, 7(6): 479-496

ISSUE DATE:

1967-03-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/85993>

RIGHT:

Spin Density Wave に対する磁場効果

山 崎 京 子 (京都産業大理)

(2月21日受理)

§ 1 序 言

金属 Cr は $T_N = 310^\circ\text{K}$ 以下で正弦波状スピン配列を示す。この正弦波は体心立方格子の一つの主軸の方向に沿って走り、その波数は略 $1/a$ (a : 格子定数) である。 $1/a$ からの波数のずれは T_N 直下で $1/27a$ 又は $1/28a$, 121°K で $1/21a$, これ以下の温度では一定である。 121°K 以上では横波、それ以下では縦波をなしている。⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾

Wilkinson 等⁽⁵⁾ の実験によれば 510°K 及び 706°K に於て局在磁気能率は観測されておらず、従つて T_N 以下で現われる磁気能率は伝導電子 (3d 電子) から self-consistent に生じたものであると考えられる。伝導電子からの Spin Density Wave (SDW) の発生は最初 Overhauser⁽⁶⁾ (1960) によつて理論的に論ぜられた。彼は一次元自由電子系に対して δ 函数型交換相互作用を仮定し、適当な波数の SDW は常磁性状態よりも安定であることを示した。1962 年⁽⁷⁾ には彼は三次元自由電子ガスも unscreened coulomb interaction を考えれば常磁性状態より SDW を安定化することを示した。しかし吉森⁽⁸⁾ (1961) は三次元の場合には δ 函数型相互作用を仮定すれば、SDW は安定にならないことを示している。unscreened coulomb interaction の仮定は物理的でなく、むしろ δ 函数型と考える方が現実に近いと思われるので吉森の結果は SDW の安定性を疑問視する役割を演じた。

これらの研究はすべて結晶格子の周期性の効果、いわゆる Umklapp effect を考慮していない。もしこの効果を考慮に入れば波数 \vec{q} の波のみでなくこれと同等な波数 $\vec{q} + \vec{K}$ (\vec{K} は逆格子ベクトル) の波も亦 SDW の安定性に寄与する。この点は芳田⁽⁹⁾ によつて指摘されたが立木、永宮⁽¹⁰⁾ (1963) 及び永宮、望月、

山崎京子

山崎⁽¹⁾ (1964) によつて詳しく研究された。彼等は δ 函数型相互作用を持つた三次元の系に於ても、電子密度及び交換相互作用の大きさが適當であれば SDW が安定になることを証明した。この結論を導くにあたつては単一バンド模型が用いられ又第一 Brillouin 域内に於て自由電子様エネルギー・スペクトルが仮定された。(現実の Cr のバンド構造については文献^{(12)~(16)}を参照)

上記研究並びにこの論文に述べる研究の完成後、Fedders & Martin⁽²⁾ は Umklapp effect を考慮しなくても二重に縮退したバンド間の交換相互作用によつて SDW が安定化することを示した。即ち我々の模型に於ては単一バンド内の Umklapp effect が本質的であり、F-M 模型に於てはバンド間相互作用が本質的である。

実在の金属 Cr に於てはこれらの互に異なつた二つの機構が同時に作用しているものと考えられる。しかしそのいずれが優勢であるかについては未だ何等の証拠もない。

この論文は外磁場の下に於ける SDW (正弦波状とらせん状の双方) の挙動を NMY⁽¹⁾ と同様な模型を用いて研究したものである。しかしこの問題を完全に解くことは非常に難かしいので本研究では次の二つの場合のみを扱つた。即ち磁場と SDW の振巾の何れか一方が非常に小さくて他方は有限の大きさを持つとして、先ず強磁場下に於ける無限小 SDW の安定性を論じ、次に微小磁場下に於ける有限振巾の SDW の帯磁率を論じた。

§ 2 準 備

外磁場下にある伝導電子の系を考えよう。この系のハミルトニアンは

$$\mathcal{H} = \sum_i (\mathcal{H}_0^i + \mu_B H \sigma_z^i) + \sum_{i < j} \mathcal{H}_{int}^{ij} \quad (2.1)$$

ここに i, j は電子の番号、 $\mathcal{H}_0^i + \mu_B H \sigma_z^i$ はこのハミルトニアンの一電子部分、 \mathcal{H}_{int}^{ij} は相互作用する二電子部分である。 \mathcal{H}_0^i は運動エネルギー + 結晶場のポテンシャル、 $\mu_B H \sigma_z^i$ はゼーマン項 (外磁場は $+z$ の方向) である。

単一バンド模型を仮定すれば第一 Brillouin 域に属する各 \vec{k} に対し \mathcal{H}_0 の固有函数 $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})$ が対応する。それは Wannier 函数 $w(\vec{r})$ を用いて次のように

現わされる。

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \exp[i\vec{k} \cdot \vec{R}_j] w(\vec{r} - \vec{R}_j) \quad (2.2)$$

ここに N は原子の総数、 \vec{r} は電子の位置ベクトル、 \vec{R}_j は格子点の位置ベクトルである。

遷移金属例えば Cr の 3d 電子は結晶内に於て各原子の近傍に可成り局在していると考えられるので、次のような仮定をおく。

$$\begin{aligned} & \int w^*(\vec{r}_1 - \vec{R}_i) w^*(\vec{r}_2 - \vec{R}_j) \mathcal{U}_{\text{int}} w(\vec{r}_1 - \vec{R}_k) w(\vec{r}_2 - \vec{R}_l) d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 \\ &= \delta_{ik} \delta_{jl} \delta_{ij} \frac{\hbar^2}{2m^*} U \end{aligned} \quad (2.3)$$

(2.3) は「二電子間の相互作用は、二電子が同一原子の近傍にあるときのみ働く」ことを意味し、この意味で相互作用は δ 函数型である。

\mathcal{U}_0 の固有値 $\epsilon(\vec{k})$ については、第一 Brillouin 域内で自由電子様エネルギー Spektrum を仮定する。

$$\epsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \quad (2.4)$$

\vec{k} が第一 Brillouin 域に属さぬときは $\epsilon(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k} + \vec{K})$ とする。ここに \vec{K} は逆格子ベクトルで $\vec{k} + \vec{K}$ は第一 Brillouin 域の中にあるようにとる。

電子系の状態は、一電子波動函数を要素とする Slater 行列式で記述されると仮定すれば、我々の問題は全エネルギーを最小とするような Slater 行列式を見出すことである。今 Slater 行列式の要素は \mathcal{U}_0 の固有函数であると仮定し、唯 + spin を持った電子数 n_+ と - spin の電子数 n_- は等しくなつてもよいとする。このとき全エネルギーを最小ならしめる Slater 行列式は次の如くである。

もし \mathcal{U}_{int} の交換積分 ((23) 式の U) が十分大ならば外磁場 $H = 0$ の場合に於ても $n_+ = 0$, $n_- = n$ (n : 伝導電子の総数) の強磁性状態が最安定となる。これは Stoner モデルの self-consistent な一般化である。(分子場 M を天

山崎京子

下りに与えるのではなく、ハミルトニアン (2.1) から出発して self-consistent に定めるという意味で一般化である) 交換積分 U が小さい場合には $H=0$ の時 $n_+=n_-$ の常磁性状態が最安定となる。この場合には小さい磁場に対しては n_--n_+ は H に比例する。これは Pauli 常磁性の self-consistent な一般化である。交換積分 U が中間的な値を持つときは、 $H=0$ に於ける最安定状態は $0 < n_--n_+ < n$ となる。この状態は unsaturated ferro (=USF) と呼ばれる。以上の結果を導く方法の概要は § 3 で説明する。

§ 3 最安定 USF の決定

次のような一電子の平均ハミルトニアンを考える。

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + \mu_B (H+M) \sigma_z \quad (3.1)$$

ここに M は後程 self-consistent に定められるべき未定定数である。 \mathcal{H}_1 の固有値は $E^\pm(\vec{k}) = \epsilon(\vec{k}) \pm \mu_B (H+M)$ (複号は + spin 又は - spin に対応) となる。

$E^\pm(\vec{k})$ の小さい順に固有函数 $\varphi_{\vec{k}}^\pm(\vec{r})$ を選ぶ。選ばれた \vec{k} の存在範囲は $\vec{k}=0$ を中心とし半径がそれぞれ k_+ , k_- の同心球となる。ただし

$$\begin{cases} k_+^2 + \tilde{\mu}_B (H+M) = k_-^2 - \tilde{\mu}_B (H+M) \\ \frac{4\pi}{3} k_+^3 + \frac{4\pi}{3} k_-^3 = \frac{n}{N} V \end{cases} \quad (3.2)$$

$$\quad (3.3)$$

ここに $\tilde{\mu}_B = 2m^* \mu_B / \hbar^2$, 又 V は第一 Brillouin の体積である。

得られた Slater 行列式について全エネルギーを計算すると結果は

$$E_{\text{total}} = \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} (\epsilon(\vec{k}) + \mu_B H) + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} (\epsilon(\vec{k}) - \mu_B H) + \frac{\hbar^2 U}{2m^* N} n_+ n_- \quad (3.4)$$

(3.2), (3.3) より k_+ , k_- は M の函数であるから E_{total} も M の函数となる。

E_{total} を最小にする M は $dE_{\text{total}}/dM = 0$ から定まるが、それは次の形になる。

$$\tilde{\mu}_B M = \frac{U}{2V} \frac{4\pi}{3} (k_-^3 - k_+^3) \quad (3.5)$$

H, n, U を与えて (3.2), (3.3), (3.5) から k_+, k_-, M を解くことが出来る。しかし実際には助変数として H の代りに $\alpha = H + M$ を用いた方が便利である。 M を α の函数として定めると $H = \alpha - M$ も又 α の函数になるから、 α を消去して H と M の間の関係を見出すことが出来る。

α を増して行くと強磁性状態 $n_+ = 0, n_- = n$ を得る。かくて n と U を与えて ferro と USF の間の臨界磁場 H_F を定めることが出来る。又 $H = 0$ の特別の場合を考察することにより § 2 末に述べた諸結果を導くことが出来る。

§ 4 無限小 SDW

我々の次の問題は § 3 の USF に比べて SDW が更に安定であるか否かを調べることである。これは Slater 行列式の要素として \mathcal{M}_0 の固有函数でなく、少しく変調された波動函数を採つた方が全エネルギーがより低くなるだろうかということ調べることになる。この目的のために、次のように平均化された一電子ハミルトニアンを考えよう。

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + \mu_B (H + M) \sigma_z + \mathcal{H}_{SDW} \quad (4.1)$$

SDW としては正弦波状及びらせん状の双方を考える。又ゼーマン項が立方対称を破つているので系のエネルギーはスピンの方向が z 軸に平行か直角かによつて異なるであろう。そこで次の四種類の SDW を考える。

1 Screw A ($x y$ 面内での回転)

$$\mathcal{H}_{SDW} = \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \{ \sigma_x \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) + \sigma_y \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \} \quad (4.2) - 1$$

2 Screw B ($y z$ 面内での回転)

$$\mathcal{H}_{SDW} = \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \{ \sigma_z \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) + \sigma_y \sin(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \} \quad (4.2) - 2$$

3 Sine A (z 軸に沿う振動)

山崎京子

$$\mathcal{H}_{\text{SDW}} = 2 \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \sigma_z \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \quad (4.2) -3$$

4 Sine B (x軸に沿う振動)

$$\mathcal{H}_{\text{SDW}} = 2 \sum_i g(\vec{r} - \vec{R}_i) \sigma_x \cos(\vec{q} \cdot \vec{R}_i) \quad (4.2) -4$$

well-localized Wannier 函数の仮定 (2.3) に対応して $g(\vec{r} - \vec{R}_i)$ についても次の仮定をおく。

$$\int w^*(\vec{r} - \vec{R}_i) g(\vec{r} - \vec{R}_j) w(\vec{r} - \vec{R}_k) d^3 \vec{r} = \delta_{ij} \delta_{ik} g \quad (4.3)$$

(4.1) の固有函数を正確に求めることは非常に難かしいので無限小振巾の SDW を考えよう。すると通常の摂動計算により \mathcal{H}_1 の固有函数 $\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ が求められる。例えば Screw A については次の如くである。

$$\left. \begin{aligned} \phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) &= \cos \theta_{\vec{k}}^{\pm} \phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) + \sin \theta_{\vec{k}}^{\pm} \phi_{\vec{k} \pm \vec{q} \pm \vec{K}}^{\pm}(\vec{r}) \\ \tan \theta_{\vec{k}}^{\pm} &= -\frac{1}{2} \frac{g}{x^{\pm}(\vec{k}) \mp \mu_B (H+M)} \\ x^{\pm}(\vec{k}) &= \frac{1}{2} \{ \epsilon(\vec{k} \pm \vec{q} \pm \vec{K}) - \epsilon(\vec{k}) \} \end{aligned} \right\} \quad (4.4)$$

(複号同順)

§ 3 で述べた Slater 行列式に於て $\phi_{\vec{k}}$ を $\psi_{\vec{k}}$ でおきかえれば全エネルギーは少し変る。例えば Screw A については

$$E_{\text{total}} = E_{\text{total}}^0 + \frac{g^2}{2} (f_1(H+M) - U f_2(H+M)) + O(g^4) \quad (4.5)$$

$$\left. \begin{aligned} f_1(H+M) &= \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x^+(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x^+(\vec{k}) + \mu_B(H+M)} \\ f_2(H+M) &= \frac{\hbar^2}{4m^*N} \left\{ \sum_{|\vec{k}| \leq k_+} \frac{1}{x^+(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} + \sum_{|\vec{k}| \leq k_-} \frac{1}{x^+(\vec{k}) - \mu_B(H+M)} \right\}^2 \end{aligned} \right\} \quad (4.6)$$

g^4 以上の項を無視すれば全エネルギーは g に依らない項と g^2 に比例する項とからなる。前者はUSFの全エネルギーと同じものである。其故 g^2 の係数の符号はUSFがSDWに対して locally stable か否かを決定する。もしこの符号が正であればUSFの方が安定、負であればSDWの方が安定となる。従つてSDWがUSFより安定となる条件は次の如く書ける。

$$U > U_{\text{crit}} \equiv \frac{f_1(H+M)}{f_2(H+M)} \quad (4.7)$$

ここで $f_1 > 0$, $f_2 > 0$ を仮定した。この仮定は我々の数値計算に於ては常に成立つていた。

Screw A 以外のSDWについても同様にして U_{crit} の式が得られる。その具体的な形はここには書かないが、ただScrew AとSine Bとでは U_{crit} が同じにもなることを言つておく。なお $H=0$ に於てはこれら四つの構造は同じ U_{crit} の値をもつ。

§ 5 計算方法

§ 4の所論に基づいて (U, H) 面内にSDWの安定領域を示す為の状態図を描く手順を要約しよう。

先ず§ 3で説明したような方法で最安定USFを決定する。次にこれに無限小SDWを加えることによりSDWがUSFに比べて locally stableになる為の条件を見出す。この条件は(4.7)に与えられているが、 f_1, f_2 とも $\alpha=H+M$ の他に実はSDWの波数ベクトル \vec{q} にも依存することを注意せねばならぬ。通常最安定状態は最も縮退の少ない状態と考えられるから、 \vec{q} は結晶主軸の一つの方向をとると考えてもよからう。すると U_{crit} の値は一定の α に対しては $q=|\vec{q}|$ のみによつて決る。種々の波数をもつたSDWの中のどれかがUSFより安定となるための条件は次の如く書かれる。

$$U > U_{\text{crit}}(\alpha) \equiv \min_q U_{\text{crit}}(\alpha, q) \quad (5.1)$$

なお $U \rightarrow U_{\text{crit}}(\alpha)$ の極限に於ては最安定SDWの波数は、 $U_{\text{crit}}(\alpha, q)$ を最

山崎京子

小にする q_0 に近づくに違いないから、 U_{crit} の q -依存性を調べれば SDW の波数を推定することも出来る。

$U_{\text{crit}}(\alpha)$ の値を (3.5) の U に代入すれば U_{crit} の値が得られ従つて $H_{\text{crit}} = \alpha - M_{\text{crit}}$ の値が得られる。 U_{crit} も H_{crit} も共に α と n の函数であるから、 n を一定にして種々の α の値に対する点 (U_{crit} , H_{crit}) を $U \sim H$ 面に描けば、SDW の安定領域を示す状態図が得られる。

実際の計算に於ては U の代りに I を、又 n の代りに k_F を用いた。但し

$$I = \frac{1}{U}, \quad I_{\text{crit}} = \frac{1}{U_{\text{crit}}}, \quad \frac{n}{N} V = \frac{8\pi}{3} k_F^3 \quad (5.2)$$

I_{crit} の数値計算は次にあげる k_F , α , q に対してなされた。

k_F : 0.48500, 0.48875, 0.49250, 0.49625, 0.50000,

0.50375

α : 0.000 から 0.020 迄 0.001 の間隔に。0.023, 0.025,

0.027

0.030 から 0.130 迄 0.005 間隔に。0.150, 0.170, 0.200,

0.250

q : 1.00 から 0.85 迄 0.01 間隔に。

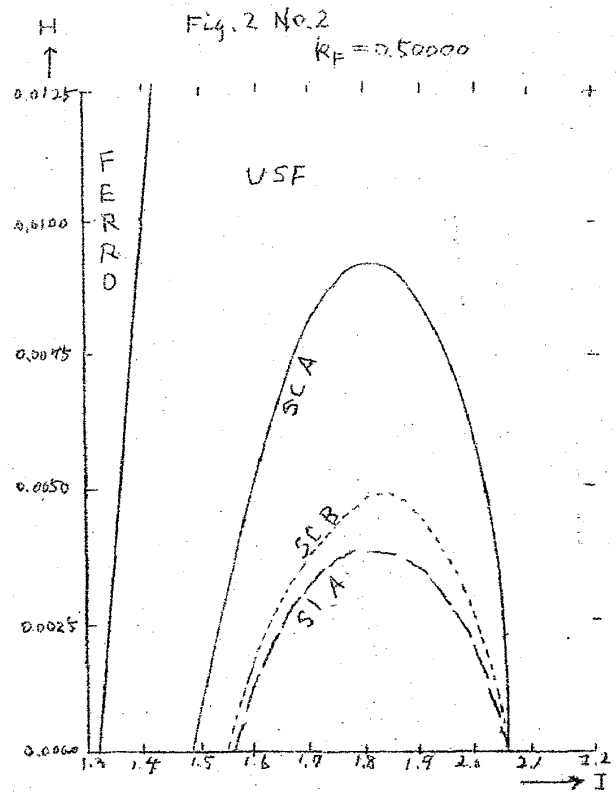
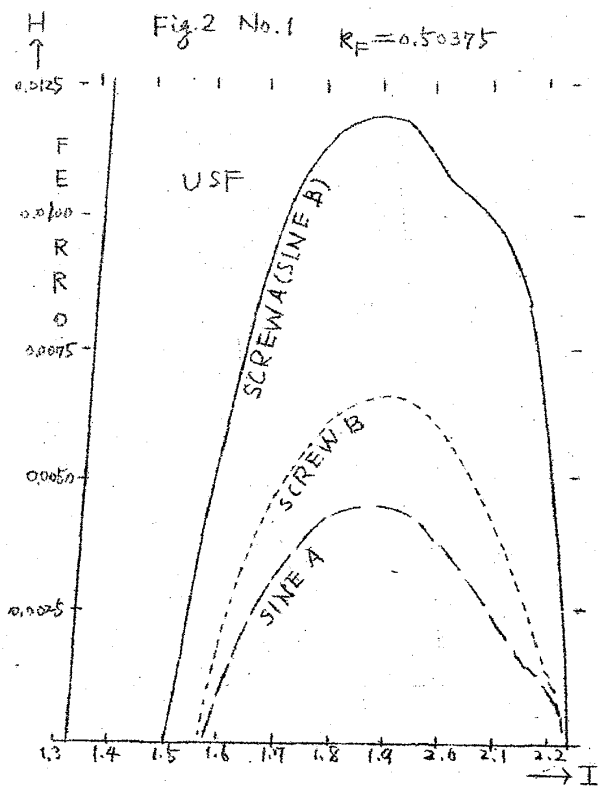
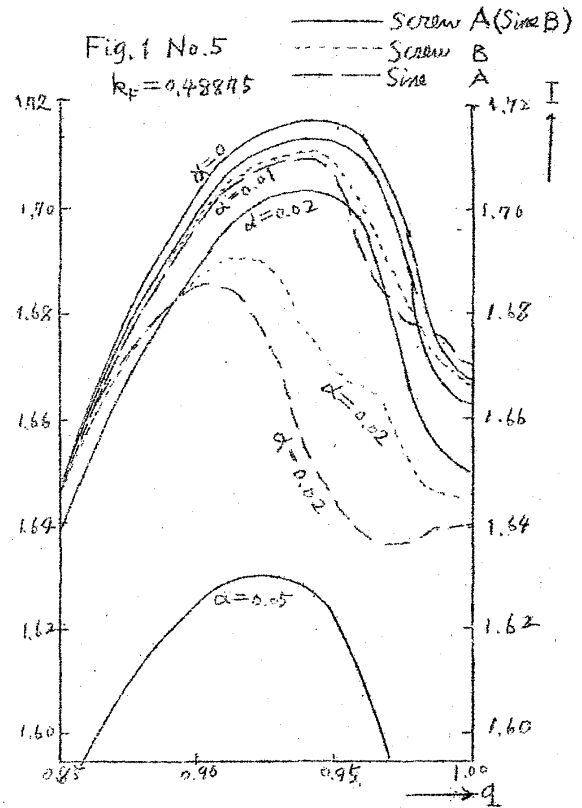
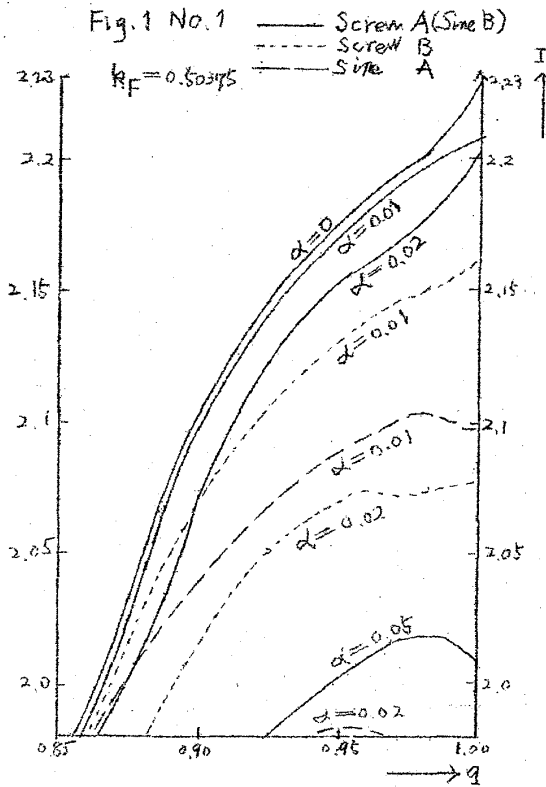
尚数値は k_F と q については $2\pi/a$ の単位で、 α と H_{crit} は $2\pi^2\hbar^2/m^*a^2\mu_B$ の単位で、又 U は $2\pi^2\hbar^2/m^*a^2$ の単位で示している。但し a は格子定数。

§ 6 結 果

数値計算の結果は幾つかの図と表にまとめられている。Fig.1 は I_{crit} の q 依存性を示すもので、例として $k_F=0.50375$ 及び $k_F=0.48875$ に対する二枚のグラフをあげてある。異つた曲線は曲つた α の値に対応する。

Fig.2 (No.1 ~ No.6) に於ては § 5 で説明したように (I, H) 面内に SDW の安定領域を示す為の状態図が描かれている。尚強磁性状態の出現領域も記してある。

Spin Density Wave



山崎京子

Fig. 2 No.3 $k_F = 0.49525$

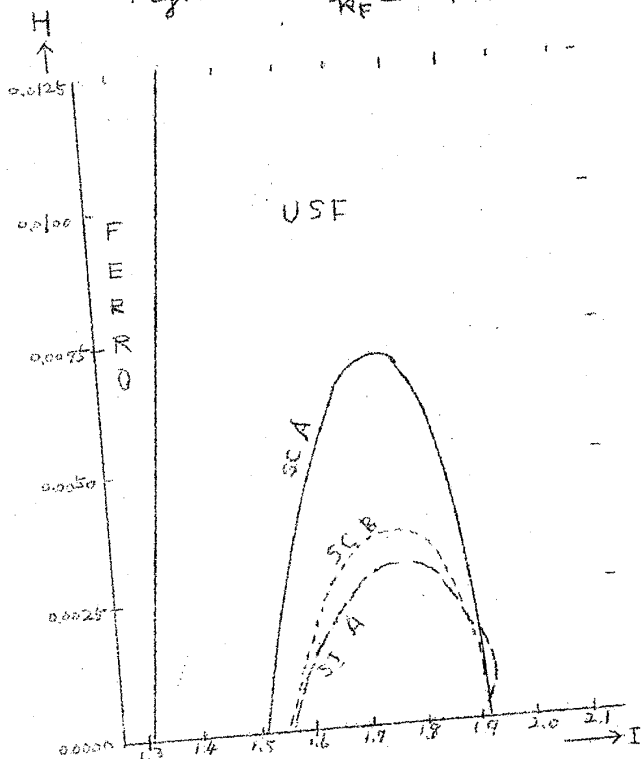


Fig. 2 No.4 $k_F = 0.49250$

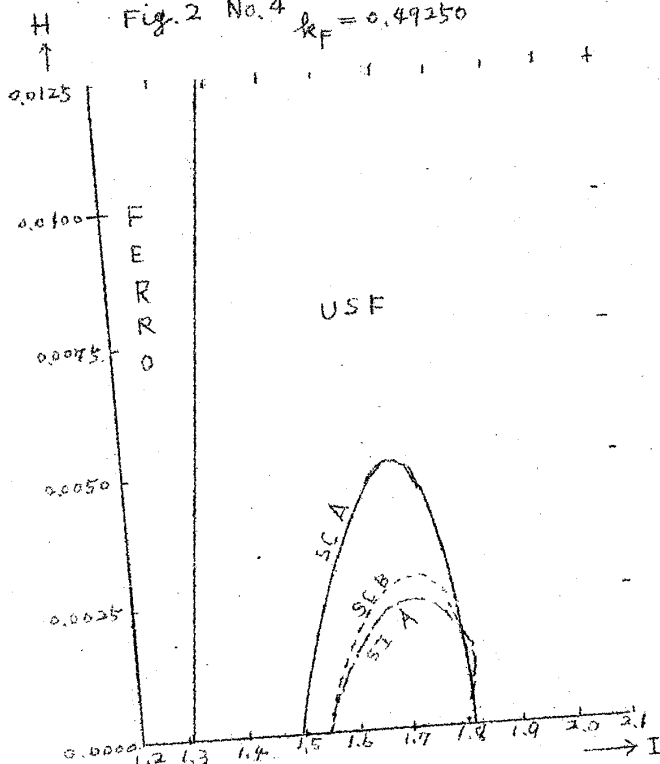


Fig. 2 No.5 $k_F = 0.48875$

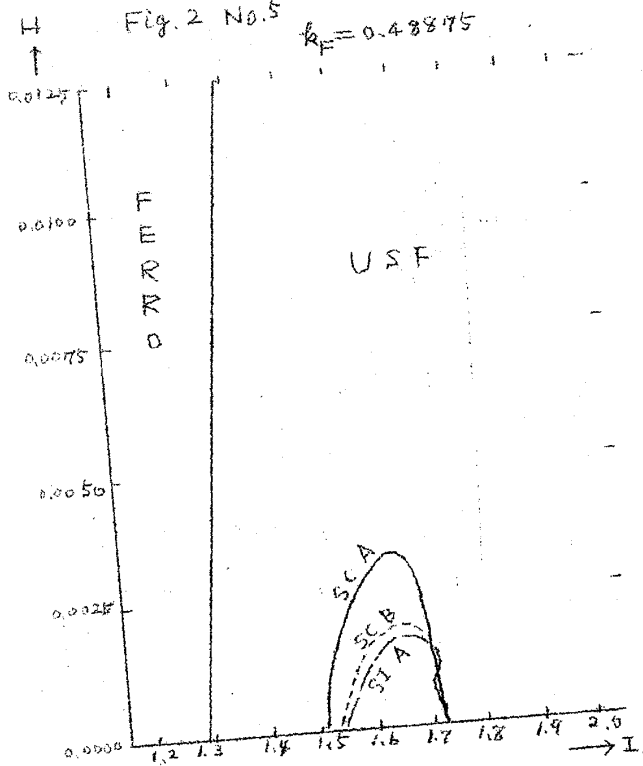


Fig. 2 No.6 $k_F = 0.48500$

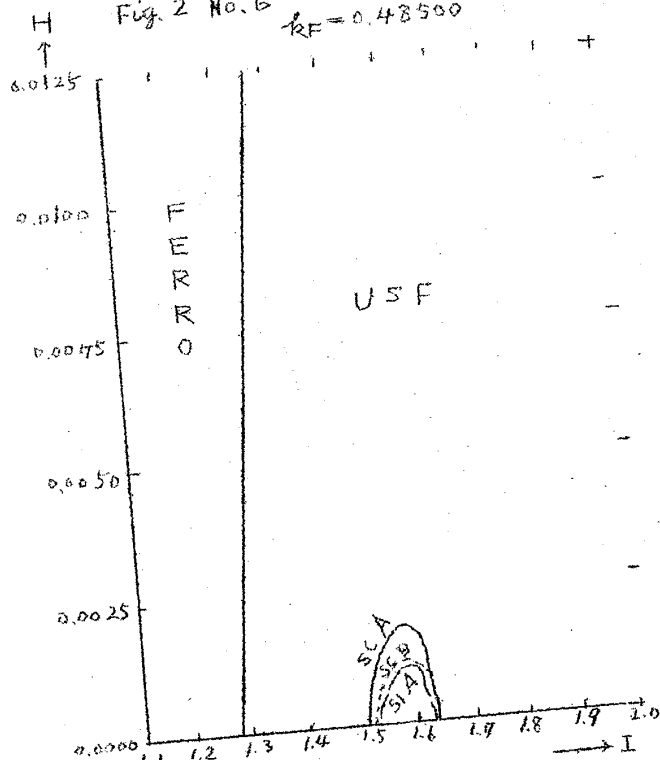


Table 1. The magnetization rate etc., at the top of H_{crit} curve in Fig.2.

k_F	α	I_{crit}	H_{crit}	ζ
0.50375	0.070	1.8841	0.01196	0.4084
0.50000	0.065	1.8147	0.00938	0.3855
0.49625	0.060	1.7504	0.00710	0.3618
0.49250	0.055	1.6895	0.00507	0.3372
0.48875	0.050	1.6472	0.00330	0.3116
0.48500	0.040	1.5895	0.00184	0.2538

§ 4 で述べたように、四種の SDV の中 Screw A と Sine B は同じ結果になる。Fig.1, Fig.2 のすべてに於て、Screw A 又は Sine B に対する結果は実線で、Screw B は点線で、Sine A は破線で描かれている。

Table 1 は Fig.2 の (I_{crit}, H_{crit}) 曲線の頂点に於ける磁化率 $\zeta = (n_- - n_+) / (n_- + n_+)$ の値を、 α , I_{crit} , H_{crit} の値と共に示している。

§ 7 討 論

(i) Fig.1 によると SDW の波数 q_0 は α が増加するに従つて減少する。又 (ここには Fig.1 は二枚しか載せていないが他の k_F の値に対する同様なグラフと比較してみると) q_0 は k_F が減少するにつれて減少することもある。実験的には後者の関係のみが磁場零の場合に知られている。⁽¹⁸⁾

(ii) Fig.2 によれば SDW 出現のための I の範囲は、 k_F の値にもよるが大体 1.5 から 2.0 である。Fermi energy ϵ_F を単位として換算すれば、これは大体

$$2.0 \epsilon_F \leq U \leq 2.7 \epsilon_F \quad (7.1)$$

を意味している。

(iii) U は原子内 Coulomb 積分であるからその値は e^2/r_0 (r_0 は原子半径)

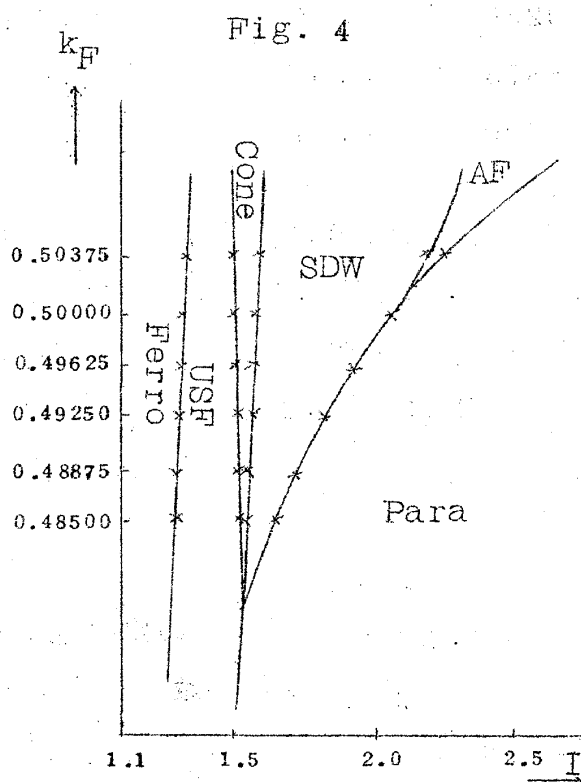
山崎京子

即ち 10e.v. の order であり一方 Fermi energy は 1e.v. order である。この限りに於ては条件 (7.1) の成立は不可能である。しかし我々はこの研究に於て電子間の相関効果を見かけ上 U の値をその実効値 U_{eff} に減少させる働きをする。⁽¹⁹⁾ もし U の代りに U_{eff} を採用すれば、幾つかの金属について条件 (7.1) は満されるように思われる。しかし個々の金属についての U_{eff} の推定は更に複雑であろう。

(iv) Fig.2 から外磁場が十分大きい場合には SDW は消滅して USF に移行することがわかる。臨界磁場 H_{crit} の値は k_F と U によるが大体 0.005 の order である。(単位は $2\pi^2\hbar^2/m^*a^2\mu_B$)。単位を換算すればこれは 10^6gauss の order を意味する。この値は非常に大きい。USF が強磁性状態に変化する臨界磁場 H_F の $1/40$ に過ぎない。($I \rightarrow \infty$ に対する H_F の漸近値は 0.1985 (単位は前と同じ))。

(v) 外磁場 $H = 0$ の時だけ考えて、Fig.2 の結果を (I, k_F) 面に於ける種々のスピン構造の間の相図に要約することが出来る。(Fig.4) 我々は六つの k_F に就いてしか計算していないので、 k_F 依存性を論ずるには十分ではないが Fig.4 を作るに当つては大ざっぱな内挿及び外挿を行なうと共に、NMY⁽¹¹⁾ の結果をも参照した。

Fig.4 に於て "Cone" と呼ばれる状態は平均ハミルトニアン (4.1)(4.2) に於て $H = 0$ に対しても θ と M の両方を正にするような状態である。これは Penn⁽²⁰⁾ の論文で言う "Ferri" に対応すると思われる。しかし我々の結果は



local stability の議論に基づいているので、有限振巾の "Cone" 状態が最安定か否かは尙未解決である。

Fig.4 のように幾つかの助変数を用いて相図を作ることは遷移金属の磁性の統一的理解に大変有用であろう。

(v) Fig.2 によると殆んど総ての場合、特に高磁場に於て、四種の SDW の中 Screw A 又は Sine B (即ち外磁場とスピンの向きが直交するような SDW) が最安定である。しかし幾つかの例外的な場合には Sine (即ち外場に平行なスピンを持つた正弦波構造) が最安定であり得る。これらの例外的な場合は次の如くである。(単位は § 5 に説明あり)

$$(1) \quad k_F = 0.49625 \quad -0 \leq H \leq 0.0018$$

$$(2) \quad k_F = 0.49250 \quad 0 \leq H \leq 0.0019$$

$$(3) \quad k_F = 0.48875 \quad 0.0012 \leq H \leq 0.0016$$

しかしこのような定量的結果は、計算誤差の推定を行っていないので確定的なものではない。

(vi) 我々の全ハミルトニアン (2.1) に於ては取扱いの難しさの故に軌道角運動量の影響を考慮しなかつた。軌道角運動量は外磁場との相互作用によりランダウ反磁性を惹起し、又スピン角運動量と相互作用してスピン分極 σ の方向を決める役割を演ずると思われる。これらの効果は将来の研究に値するであろう。

§ 8 帯磁率の計算方法

今度は SDW の振巾は有限で磁場の方が無限小である場合を考えよう。考え方は前 § 迄と同じで本当のハミルトニアン (2.1) の一電子平均ハミルトニアンとして次のものを考える。

$$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{SDW}} + \mu_B (H+M) \sigma_z \quad (8.1)$$

これは (4.1) と全く同じ式であるが、(8.1) に於ては θ の代りに $H+M=\alpha$ が無限小であるべき点が異つている。

先ず SDW の帯磁率の計算方針を一般的に説明する。 $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{SDW}}$ の固有函数

山崎京子

$\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ は既知のものとする。 $\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ を底として \mathcal{M}_1 を行列で表わすと非対角要素は無限小となる。そこで \mathcal{M}_1 の固有函数 $\phi_{\vec{k}}^{\pm}$ と固有値 $\epsilon^{\pm}(\vec{k})$ は普通の摂動計算によつて求められる。

$\epsilon^{\pm}(\vec{k})$ の小さい順番に $\phi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ を選び、 $\epsilon^{\pm}(\vec{k}) = E_0$ のとき選ばれた $\phi_{\vec{k}}^{\pm}$ の個数が n 個 (= 伝導電子の総数) に達したとする。こうして得られた Slater 行列式について系の全エネルギーを (2.1) に依つて計算すると、結局 E_{total} は H と α の函数になる。

$$E_{\text{total}} = E_{\text{total}}(H, \alpha) \quad (8.2)$$

self-consistency の条件は、 E_{total} を α の函数として最小にするようにして得られる。

$$\frac{\partial E_{\text{total}}}{\partial \alpha} = 0 \quad (8.3)$$

一方単位質量あたりのスピン磁化 (の z 成分) は次のように表わされる。

$$\mu = -\frac{\mu_B}{m_0 N} \left\{ \sum_{\epsilon^+(\vec{k}) \leq E_0} \langle \phi_{\vec{k}}^+ | \sigma_z | \phi_{\vec{k}}^+ \rangle + \sum_{\epsilon^-(\vec{k}) \leq E_0} \langle \phi_{\vec{k}}^- | \sigma_z | \phi_{\vec{k}}^- \rangle \right\} \quad (8.4)$$

但し m_0 は原子の質量。

$\phi_{\vec{k}}^{\pm}$ と $\epsilon^{\pm}(\vec{k})$ は α に依るから結局 μ は α の函数として表わせる筈である。

$$\mu = \mu(\alpha) \quad (8.5)$$

そこで帯磁率 χ は次のようにして計算出来る。

$$\chi = \frac{d\mu}{dH} \Big|_{H=0} = \frac{d\mu}{d\alpha} \frac{d\alpha}{dH} \Big|_{\alpha=0, H=0} \quad (8.6)$$

所が α は (8.3) の解であるから

$$\frac{d\alpha}{dH} = - \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial H \partial \alpha} / \frac{\partial^2 E_{\text{total}}}{\partial \alpha^2}$$

従つて (8.2) と (8.5) との具体的な形を得さえすれば、(8.6) によつて帯磁率

を計算出来る。

以上で一般的定式化を終り次に実際の計算について説明する。我々は (8.1) の $\mu_B(H+M)\sigma_z$ を摂動項とみなしたから、無摂動の状態即ち磁場のないときの SDW は既知のものとせねばならぬ。実際にはらせん状 SDW の最安定構造は NMY⁽¹⁾ に依つて求められているが、正弦波状 SDW についてはわかっていない。其故帯磁率の計算もらせん状 SDW についてのみ可能である。 χ_{SDW} として (4.2) -1 を採れば、磁場をスピン回転面に直角にかけたときの帯磁率 (= 垂直帯磁率) 又 (4.2) -2 を採れば磁場をスピン回転面に平行にかけたときの帯磁率 (= 平行帯磁率) を計算することになる。

本 § の計算方針を適用すると、垂直帯磁率 χ_{\perp} については次のようになる。

(8.5) の具体的な形は

$$\mu(\alpha) = \frac{\mu_B}{m_0 N} J(\alpha) \quad \left. \begin{aligned} J(\alpha) &= \sum_{\epsilon^-(\vec{K}) \leq E_0} \frac{|y^-|}{\sqrt{(y^-)^2 + g^2}} - \sum_{\epsilon^+(\vec{K}) \leq E_0} \frac{|y^+|}{\sqrt{(y^+)^2 + g^2}} \end{aligned} \right\} \quad (8.7)$$

$$y^{\pm}(\vec{K}) = \frac{1}{2} \{ \epsilon(\vec{K} \pm \vec{q} \pm \vec{K}) - \epsilon(\vec{K}) \} \mp \mu_B(H+M) \quad (8.8)$$

又 (8.2) の具体的な形は、 $J(\alpha)$ を用いて次のように表わせる。

$$E_{\text{total}}(\alpha, H) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{U}{4N} (J(\alpha))^2 + \mu_B(H - \alpha) J(\alpha) + \mu_B \int J(\alpha) d\alpha \quad (8.9)$$

従つて (8.6) は

$$\left. \begin{aligned} \chi_{\perp} &= \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{2\mu_B^2}{m_0 U} \frac{J'(0)}{\mu_B - J'(0)} \\ &\approx \frac{2m^*}{\hbar^2} \frac{2N}{U} \mu_B \end{aligned} \right\} \quad (8.10)$$

($J(\alpha)$ は奇函数なので $J''(0)=0$)。

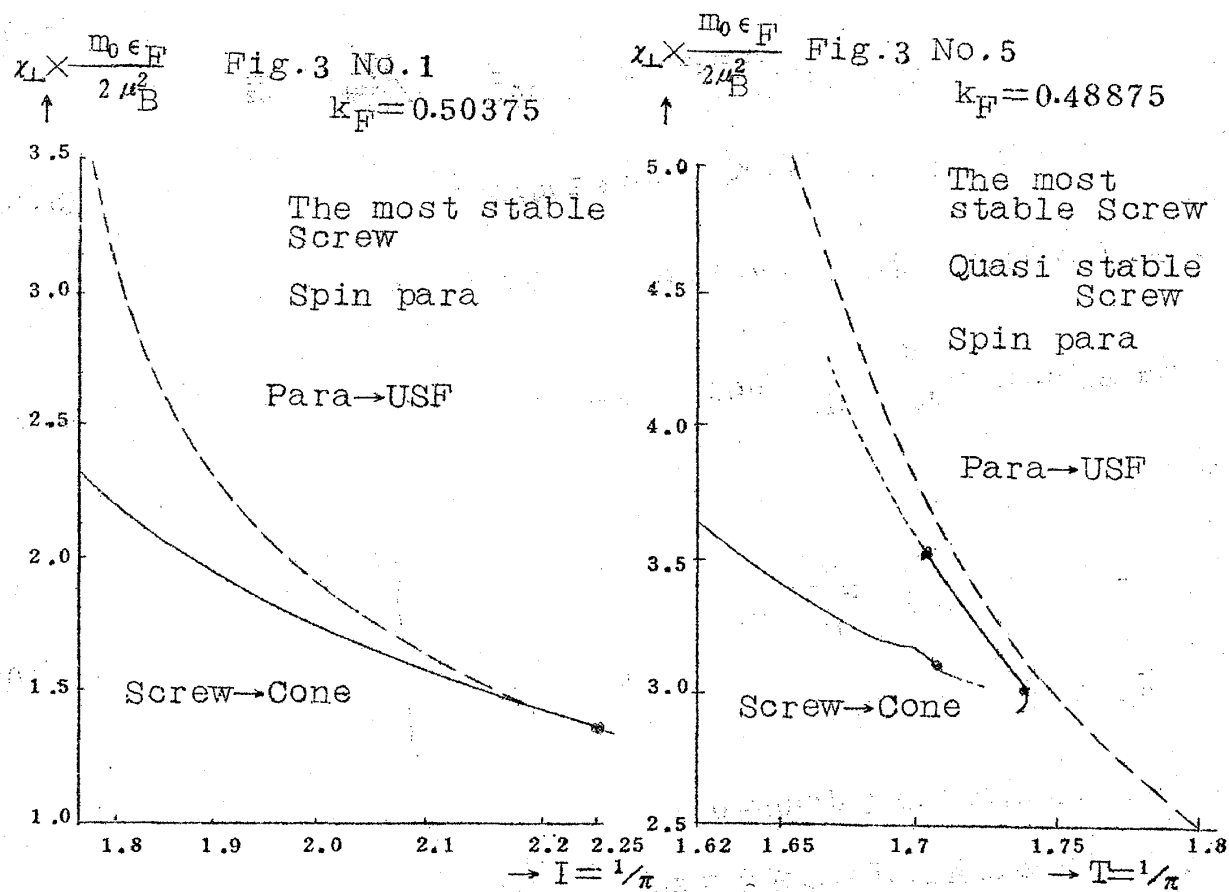
かくて $J'(0)$ の数値計算をしさえすれば χ_{\perp} が得られる。

山崎京子

平行帯磁率 χ_{\perp} については事情はもつと複雑である。それは \mathcal{M}_1 の非対角要素が一つの行につき四個も現われる為で、この為 \mathcal{M}_1 の固有函数 $\phi_{\mathbf{k}}^{\pm}$ は (α^2 の order の無限小を無視して) 五個の $\phi_{\mathbf{k}}^{\pm}$ の一次結合となる。一方 χ_{\perp} の場合には $\phi_{\mathbf{k}}^{\pm}$ は二個の $\phi_{\mathbf{k}}^{\pm}$ ($=\mathcal{M}_0$ の固有函数) の一次結合ですむ。この二個と五個の相違は、以後の取扱いの複雑さには非常に大きな影響をもつ。例えば交換積分を考えるとときには χ_{\perp} の場合には $2^4=16$ 項だけ考えればよいのに χ_{\parallel} の場合には 5^4 即ち 15,625 項も考えねばならぬ。我々は χ_{\parallel} の場合にも具体的な式の計算は行わなかつたが非常に複雑なのでここには書かない。又その数値計算は実行していない。 χ_{\parallel} の計算は高速度の電子計算機によつてのみ実行可能と思われる。

§ 9 結果と討論

我々は (8.10) によつて χ_{\perp} の数値計算を行つた。先ず助変数 g, q, k_F, U



を、NMY⁽¹²⁾に於けると同じ範囲で動かして x_{\perp} の数値を計算した。次に此等助変数の値として、NMYで決めた最安定SDWのときの値を選ぶことにより、最安定SDWの帯磁率を求めた。その結果をグラフにまとめたが、ここでは $k_F = 0.50375$ 及び $k_F = 0.48875$ に対する二枚のグラフを載せる。横軸は $I=1$ の、縦軸は x_{\perp} (単位は $2\mu_B^2/m_0\epsilon_F$) である。実線は最安定SDWに対応し、点線は準安定SDW (エネルギーが二番目に低い極小を示すようなSDW) に対応している。比較のために、同様なHartree-Fockのself-consistentな方法で計算した常磁性帯磁率を破線で描いた。 $k_F=0.48875$ に対するグラフでは x_{\perp} 曲線は不連続になつてゐるが、これは最安定SDW構造の不連続変化⁽¹³⁾に対応している。各不連続点に於ては、 U が増加 (従つて I が減少) するときに x_{\perp} はより小さな値に跳んでいる。そこで「らせん状SDWの最安定構造は幾つかの極小エネルギーの状態の中で最小の x_{\perp} を持つた状態である」と言えるであろう。又最安定SDWに対する x_{\perp} は常にスピン常磁性帯磁率より小さいことが注目される。

SDWの帯磁率に関する実験結果としては、Montalvo & Marcus⁽¹⁴⁾がその異方性を調べている。これを我々の計算結果と比較するためには x_{\parallel} の数値をも必要とする。しかし§8末で説明したように x_{\parallel} の数値計算を正確に行なうのは非常に複雑である。

感 謝

この研究に当つては湯川記念財団から奨学金に依る援助を受けた。

この研究に興味を持ち激励して下さつた永宮教授 (阪大) 及び御討論いただいた金森教授 (阪大) に深く感謝します。

尙近日中に英文の論文を公表の予定である。

References

- (1) L. M. Corliss, J. M. Hastings and R. J. Weiss; Phys. Rev. Letters 3 (1959) 211.
- (2) G. Shirane and W. J. Takei; J. Phys. Soc. Japan 17 Suppl.

山崎京子

B-III (1962) 35.

- (3) V. I. Goman'kov, D. F. Litvin, A. A. Loshmanov and B. G. Lyashchenko; *Kristallografiya* 7 (1962) 790 Soviet Phys. Crystallography 7 (1963) 639.
- (4) K. J. Brown, C. Wilkinson, J. B. Forsyth and R. Nathans; *Proc. Phys. Soc. (London)* 85 (1965) 1185.
- (5) M. K. Wilkinson, E. O. Wollan, W. C. Koehler and J. W. Cable; *Phys. Rev.* 127 (1962) 2080.
- (6) A. W. Overhauser; *Phys. Rev. Letters* 4 (1960) 462.
- (7) A. W. Overhauser; *Phys. Rev.* 128 (1962) 1437.
- (8) A. Yoshimori; *Phys. Rev.* 124 (1961) 326.
- (9) K. Yosida; *Prog. Theor. Phys.* 28 (1962) 759.
- (10) M. Tachiki and T. Nagamiya; *Phys. Letters* 3 (1963) 214.
- (11) T. Nagamiya, K. Motizuki and K. Yamasaki; *Proceedings of the International Conference on Magnetism, Nottingham, Sept. 1964* Published in association with *Phys. Soc. (London)* (1965) 195.
- (12) M. Asdente and J. Friedel; *Phys. Rev.* 124 (1961) 384.
- (13) M. Asdente; *Phys. Rev.* 127 (1962) 1949.
- (14) W. H. Lomer; *Proc. Phys. Soc. (London)* 80 (1962) 489.
- (15) W. M. Lomer; *Proc. International Conference on Magnetism, Nottingham, Sept. 1964* (1965) 127.
- (16) T. L. Loucks; *Phys. Rev.* 139 (1965) A1181.
- (17) R. A. Montalvo and J. A. Marcus; *Phys. Letters* 8 (1964) 151.
- (18) S. Komura and N. Kunitomi; *J. Phys. Soc. Japan* 20 (1965) 103.
- (19) J. Kanamori; *Prog. Theor. Phys.* 30 (1963) 275.
- (20) D. R. Penn; *Phys. Rev. Letters* 15 (1965) A3.
- (21) P. A. Fedders and P. C. Martin; *Phys. Rev.* 143 (1966) 245.